

$$ZT = \alpha^2 \sigma T / \chi \quad (2)$$

Для определения ZT были проведены измерения коэффициента термо-э.д.с., электропроводимости и теплопроводности сплавов. На рисунке 1 показаны измеренные значения термоэлектрической эффективности ZT сплавов в области температур 300 – 700 К.

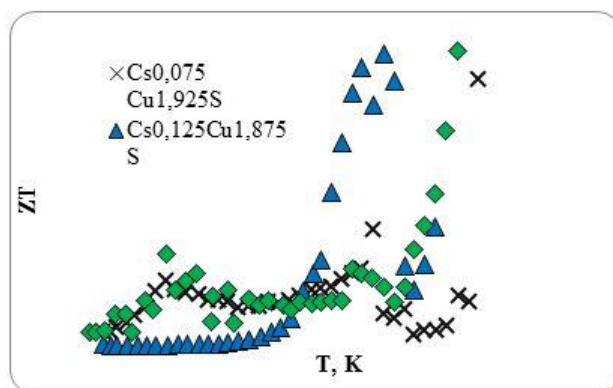


рис. 1. Температурные зависимости термоэлектрической эффективности ZT сплавов

В области фазовых переходов (550–650 К) наблюдаются высокие значения, значительно превышающие показатели ( $ZT \approx 1$  при 300–400 К) сплава теллурида висмута  $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2(\text{Se}_{1-y}\text{Te}_y)_3$ , наиболее распространенного промышленно производимого термоэлектрика [1–3]. Кроме того можно отметить, что при малой степени легирования цезием в несколько раз увеличивается ZT по сравнению с чистым сульфидом меди вблизи 400 К. Рост ZT обусловлен повышением коэффициента термо-э.д.с. и снижением теплопроводности сплавов в результате легирования.

Список публикаций:

- [1] Pengfei Qiu, Xun Shi, Lidong Chen. Cu-based thermoelectric materials // *Energy Storage Materials*. 2016. V.3. P.85–97.
- [2] Дмитриев А.В. Звягин И.П. Современные тенденции развития физики термоэлектрических материалов // *УФН*. – 2010. Т. 180, № 8. С. 821 – 838.
- [3] Z. H. Ge, B. P. Zhang et al. Synthesis and transport property of  $\text{Cu}_{1.8}\text{S}$  as a promising thermoelectric compound, *Chem. Commun.* 2011. V.47. P. 12697.

## Поведение частоты резонанса ультразвука многокомпонентной керамики при условиях стабилизации температуры

**Османова Елена Вугаровна**

**Боркунов Валентин Алексеевич**

*Волгоградский государственный технический университет*

*Бурханов Анвер Идрисович д.ф.-м.н.*

[lenakulagina69@gmail.com](mailto:lenakulagina69@gmail.com)

Известно, что пятикомпонентный состав керамики на основе цирконата-титаната свинца  $(\text{PbTiO}_3\text{-PbZrO}_3\text{-PbNb}_{2/3}\text{Zn}_{1/3}\text{O}_3\text{-PbW}_{1/2}\text{Mg}_{1/2}\text{O}_3\text{-PbW}_{3/5}\text{Li}_{2/5}\text{O}_3\text{-Yb}_2\text{O}_3)$  является не только перспективным материалом для прикладных применений, но и актуальным с точки зрения исследований различного типа физических процессов в области температур структурных фазовых переходов.

Целью настоящей работы являлось исследование стабильности упругих свойств в области размытого структурного фазового перехода в данном составе керамического материала на основе цирконата-титаната свинца.

Керамика исследуемого состава получена методом горячего прессования в институте высоких технологий и пьезотехники Южного федерального университета. Образцы изготовлены в виде брусков длиной 15 мм и толщиной 2 мм (квадрат в сечении) с электродами на больших гранях. В качестве электродов использовалось воженное серебро.

Для оценки упругих характеристик материала использовался резонансный метод измерения скорости продольных звуковых волн, когда поляризованный образец зажимался в узле колебаний и возбуждался на собственных частотах продольных колебаний. Через зажимы подавалось возбуждающее поле в виде импульсов синусоидальных колебаний длительностью 6 мс. Скорость звука  $v$  определялась по формуле (1):

$$v = \frac{2 \cdot f_r \cdot l}{n} \quad (1)$$

где  $f_r$  – частота первого резонанса образца,  $l$  – длина образца,  $n$  – номер гармоники.

Учитывая, что скорость звука прямо пропорциональна частоте резонанса, а точность определения частоты резонанса определялась по частотометру ЧЗ-64, то в работе оценивалось только поведение данного параметра (частоты), так как это напрямую указывало на изменение упругих свойств материала при постоянной температуре.

На (рис.1) представлены температурные зависимости частоты резонанса при различных температурах в поляризованной керамике.

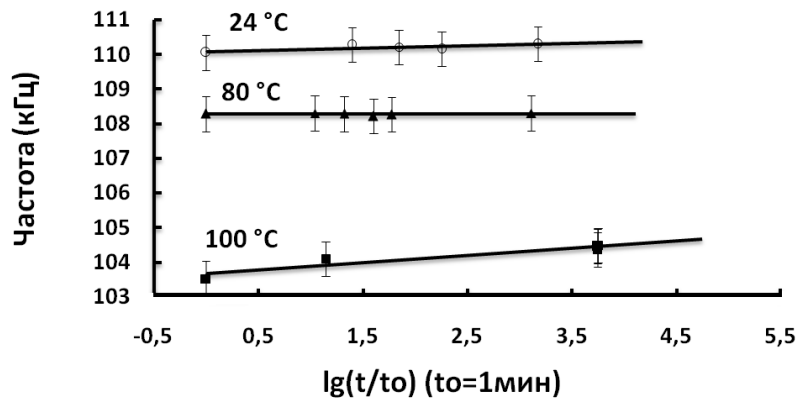


рис.1 Временная зависимость частоты резонанса при определенных температурах в многокомпонентной керамике

Как следует из хода зависимостей практически при всех температурах частоты резонанса не изменяются, или изменяются в пределах ошибки. Таким образом можно утверждать, что упругие свойства материала в диапазоне температур от  $T=24$  °C до 100 °C не подвергаются фактору старения в отличие от диэлектрических параметров в системе цирконата-титаната свинца и других сегнетопьезокерамик.

Авторы выражают благодарность сотрудникам института высоких технологий и пьезотехники Южного федерального университета за любезно предоставленные образцы испытываемой керамики.

## Моделирование из первых принципов электронной структуры сегнетоэлектрического

### $\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$

Перевалов Тимофей Викторович

Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН

[timson@isp.nsc.ru](mailto:timson@isp.nsc.ru)

Тонкие плёнки  $\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$  являются перспективными кандидаты для энергонезависимой сегнетоэлектрической памяти (Ferroelectric random-access memory, FRAM) [1]. Сегнетоэлектрический эффект этих плёнок связан со стабилизацией нецентросимметричной орторомбической фазы  $Pbc_{21}$ . Известно, что ключевым дефектом, определяющим электрофизические характеристики оксидных диэлектриков, являются вакансии кислорода. Было показано, что кислородные вакансии стабилизируют сегнетоэлектрические свойства плёнок  $\text{HfO}_2$ . С другой стороны, было показано, что генерация дефектов (вакансий кислорода) в плёнках  $\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$  в результате многократного переключения ячейки приводит к разрушению сегнетоэлектрической фазы и, как следствие к деградации сегнетоэлектрических свойств [2]. Целью настоящей работы является изучение атомной и электронной структуры кислородных вакансий в  $\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$ , а также их влияния на возможность фазового перехода от стабильной моноклинной фазы  $\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$  к орторомбической  $Pbc_{21}$ .

Надёжным методом изучения атомной и электронной структуры дефектов в твёрдых телах является квантово-химическое моделирование в рамках теории функционала плотности (ТФП). В настоящей работе моделирование проводится с использованием программного пакета Quantum ESPRESSO. Давления фазового перехода из стабильной моноклинной фазы  $m\text{-Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$  в различные орторомбические фазы ( $oI$ - ( $Pbca$ ),  $oP$ - ( $Pnma$ ) и сегнетоэлектрическая  $of$ - ( $Pbc_{21}$ )) рассчитывается, как минимум функции энтальпии системы от внешнего давления.